

УДК 517.927:517.95]:519.6

**МЕТОД КВАЗІФУНКЦІЙ ГРІНА-РВАЧОВА
У ЧИСЕЛЬНОМУ АНАЛІЗІ ТЕРМОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ
МЕТОДОМ ДВОБІЧНИХ НАБЛИЖЕНЬ**

Янбеков Р.Я.

e-mail: ravil.yanbekov@nure.ua

Науковий керівник – д-р фіз.-мат. наук, проф. Сидоров М.В.

Харківський національний університет радіоелектроніки,

кафедра прикладної математики

м. Харків, Україна

This paper considers the application of the method of two-sided approximations to the solution of a three-dimensional boundary value problem, which serves as a mathematical model of a thermochemical process. The iterative scheme is constructed using Green-Rvachev's quasi-function method. A computational experiment is carried out for the unit cube.

Математичне моделювання термохімічних процесів є одним із ключових напрямів сучасної прикладної математики, оскільки такі процеси лежать в основі функціонування широкого класу технічних і природних систем від хімічних реакторів і енергетичних установок до процесів горіння, каталізу та матеріалознавства. Особливістю термохімічних процесів є тісний взаємозв'язок між теплопереносом і хімічною кінетикою, що зумовлює суттєву нелінійність математичних моделей. Зокрема, швидкість реакції, як правило, описується експоненціальною залежністю від температури (закон Арреніуса), що призводить до виникнення складних ефектів, таких як тепловий саморозігрів, множинність стаціонарних режимів, біфуркаційні переходи, тепловий вибух (thermal runaway). Ці явища мають критичне значення для безпеки та ефективності технологічних процесів, оскільки навіть незначні зміни параметрів можуть призводити до різкої зміни режиму роботи системи. Разом із тим, експериментальне дослідження таких процесів є складним, дорогим і часто небезпечним, особливо в умовах високих температур і швидких реакцій. У зв'язку з цим математичне моделювання стає основним інструментом аналізу та прогнозування поведінки систем. Отже, актуальною науковою задачею є розробка нових та вдосконалення існуючих методів чисельного аналізу крайових задач, що виникають при математичному моделюванні термохімічних процесів.

Одним з класів математичних моделей, що виникають при дослідженні стаціонарних термохімічних процесів є перша крайова задача для напівлінійного еліптичного рівняння

$$-\mathcal{L}u = \lambda f(\mathbf{x}, u), \mathbf{x} \in \Omega, \quad (1)$$

$$u|_{\partial\Omega} = 0, \quad (2)$$

де $\mathcal{L}u = \Delta u$ або $\mathcal{L}u = \Delta u - \kappa^2 u$, $\kappa > 0$, – еліптичний оператор; u – безрозмірна

температура або концентрація, $u(\mathbf{x}) > 0$, $\mathbf{x} \in \Omega$; Ω – обмежена область з $\mathbb{R}^3$, у якій відбувається термохімічний процес; $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$; $\partial\Omega$ – межа області Ω , що є кусково-гладкою поверхнею; $\lambda > 0$ – параметр; $f(\mathbf{x}, u)$ – функція, що відповідає нелінійним джерелам тепловиділення, джерелам речовини при дифузії тощо. При описі термохімічного процесу на основі закону Арреніуса зазвичай використовуються наступні монотонні нелінійності

$f(\mathbf{x}, u) = e^u$ або $f(\mathbf{x}, u) = e^{\frac{u}{1+\beta u}}$ ($\beta > 0$ – параметр насичення). Параметр λ є узагальненою характеристикою інтенсивності тепловиділення внаслідок хімічної реакції та визначає співвідношення між швидкістю генерації тепла та його відведенням у середовище.

За допомогою методу квазіфункцій Гріна-Рвачова [1] від крайової задачі (1), (2) перейдемо до еквівалентного інтегрального рівняння Урисона та побудуємо двобічний ітераційний процес знаходження наближеного розв'язку розглядуваної задачі.

Опишемо геометрію області Ω методом R -функцій, тобто побудуємо елементарну функцію $\omega(\mathbf{x})$ таку, що $\omega(\mathbf{x}) > 0$ у Ω , $\omega(\mathbf{x}) = 0$ на $\partial\Omega$ і $|\nabla\omega(\mathbf{x})| \neq 0$ на $\partial\Omega$. Введемо

$$Q(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{\sqrt{r^2 + 4\omega(\mathbf{x})\omega(\mathbf{s})} - r}{r\sqrt{r^2 + 4\omega(\mathbf{x})\omega(\mathbf{s})}}$$

– квазіфункція Гріна-Рвачова для оператора Лапласа $-\Delta u$ у просторі $\mathbb{R}^3$;

$$Q^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{\sqrt{r^2 + 4\omega(\mathbf{x})\omega(\mathbf{s})}e^{-\kappa r} - re^{-\kappa\sqrt{r^2 + 4\omega(\mathbf{x})\omega(\mathbf{s})}}}{r\sqrt{r^2 + 4\omega(\mathbf{x})\omega(\mathbf{s})}},$$

– квазіфункція Гріна-Рвачова для оператора Гельмгольца $-\Delta u + \kappa^2 u$ у просторі $\mathbb{R}^3$;

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = -\frac{\partial^2}{\partial s_1^2} \tilde{g}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) - \frac{\partial^2}{\partial s_2^2} \tilde{g}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) - \frac{\partial^2}{\partial s_3^2} \tilde{g}(\mathbf{x}, \mathbf{s}),$$

$$K^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = -\frac{\partial^2}{\partial s_1^2} \tilde{g}^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) - \frac{\partial^2}{\partial s_2^2} \tilde{g}^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) - \frac{\partial^2}{\partial s_3^2} \tilde{g}^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) + \kappa^2 \tilde{g}^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}),$$

$$\text{де} \quad \mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3), \quad \mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3),$$

$$r = |\mathbf{x} - \mathbf{s}| = \sqrt{(x_1 - s_1)^2 + (x_2 - s_2)^2 + (x_3 - s_3)^2},$$

$$\tilde{g}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{r^2 + 4\omega(\mathbf{x})\omega(\mathbf{s})}}, \quad \tilde{g}^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{e^{-\kappa\sqrt{r^2 + 4\omega(\mathbf{x})\omega(\mathbf{s})}}}{\sqrt{r^2 + 4\omega(\mathbf{x})\omega(\mathbf{s})}}.$$

Тоді задача (1), (2) еквівалентна інтегральному рівнянню Урисона

$$u(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} K(\mathbf{x}, \mathbf{s})u(\mathbf{s})d\mathbf{s} + \lambda \int_{\Omega} Q(\mathbf{x}, \mathbf{s})f(\mathbf{s}, u(\mathbf{s}))d\mathbf{s} \quad (3)$$

у випадку $\mathcal{L}u = \Delta u$ і інтегральному рівнянню Урисона

$$u(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} K^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) u(\mathbf{s}) d\mathbf{s} + \lambda \int_{\Omega} Q^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}, u(\mathbf{s})) d\mathbf{s} \quad (3)$$

у випадку $\mathcal{L}u = \Delta u - \kappa^2 u$.

Узагальненим розв'язком u^* крайової задачі (1), (2) вважатимемо невід'ємну функцію з простору $\mathcal{C}(\bar{\Omega})$, що є розв'язком інтегрального рівняння (3) або (4) в залежності від вигляду оператора $\mathcal{L}$.

Рівняння (3) або (4) розглядатимемо як операторне рівняння з гетеротонним оператором у напівупорядкованому конусі $\mathcal{K}_+$ просторі $\mathcal{C}(\bar{\Omega})$. Нехай $f'_u(\mathbf{x}, u) > 0$, $\mathbf{x} \in \Omega$, $u > 0$, тобто функція $f(\mathbf{x}, u)$ є монотонно зростаючою за u . У конусі $\mathcal{K}_+$ для гетеротонного оператора, що визначається правою частиною рівняння (3) або (4), виділимо сильно інваріантний конусний відрізок $\langle v_0, w_0 \rangle$ і сформуємо для рівняння (3) ітераційний процес за схемою:

$$\begin{aligned} v^{(k+1)}(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega} K_+(\mathbf{x}, \mathbf{s}) v^{(k)}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} - \int_{\Omega} K_-(\mathbf{x}, \mathbf{s}) w^{(k)}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} + \lambda \int_{\Omega} Q(\mathbf{x}, \mathbf{s}) f(\mathbf{x}, v^{(k)}(\mathbf{s})) d\mathbf{s}, \\ w^{(k+1)}(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega} K_+(\mathbf{x}, \mathbf{s}) w^{(k)}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} - \int_{\Omega} K_-(\mathbf{x}, \mathbf{s}) v^{(k)}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} + \lambda \int_{\Omega} Q(\mathbf{x}, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}, w^{(k)}(\mathbf{s})) d\mathbf{s}, \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \\ v^{(0)}(\mathbf{x}) &= v_0(\mathbf{x}), \quad w^{(0)}(\mathbf{x}) = w_0(\mathbf{x}), \end{aligned}$$

а для рівняння (4) – за схемою

$$\begin{aligned} v^{(k+1)}(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega} K_+^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) v^{(k)}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} - \int_{\Omega} K_-^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) w^{(k)}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} + \lambda \int_{\Omega} Q^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) f(\mathbf{x}, v^{(k)}(\mathbf{s})) d\mathbf{s}, \\ w^{(k+1)}(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega} K_+^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) w^{(k)}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} - \int_{\Omega} K_-^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) v^{(k)}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} + \lambda \int_{\Omega} Q^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}, w^{(k)}(\mathbf{s})) d\mathbf{s}, \\ k &= 0, 1, 2, \dots, \\ v^{(0)}(\mathbf{x}) &= v_0(\mathbf{x}), \quad w^{(0)}(\mathbf{x}) = w_0(\mathbf{x}), \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} K_+(\mathbf{x}, \mathbf{s}) &= \max\{0, K(\mathbf{x}, \mathbf{s})\}, \quad K_-(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \max\{0, -K(\mathbf{x}, \mathbf{s})\}, \\ K_+^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) &= \max\{0, K^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s})\}, \quad K_-^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \max\{0, -K^{(\kappa)}(\mathbf{x}, \mathbf{s})\}. \end{aligned}$$

Записані ітераційний процеси за певних обмежень двобічно збігаються у нормі простору $\mathcal{C}(\bar{\Omega})$ до єдиного на конусному відрізку $\langle v_0, w_0 \rangle$ розв'язку крайової задачі (1), (2).

Роботу запропонованого методу продемонстровано на тестовому прикладі задачі, що розглядається в області $\bar{\Omega} = \{(x_1, x_2, x_3) : 0 \leq x_1, x_2, x_3 \leq 1\}$.

Список використаних джерел:

1. Sidorov M. V. Green-Rvachev's quasi-function method for constructing two-sided approximations to positive solution of nonlinear boundary value problems. *Carpathian Mathematical Publications*. 2018. Vol. 10, № 2. P. 360-375.